**ΦΥΛΛΟ ΣΥΜΠΛΗΡΩΣΗΣ ΤΩΝ ΑΣΚΗΣΕΩΝ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗΣ**

Να απαντήσετε τα ακόλουθα και να τα στείλετε με ηλεκτρονικό ταχυδρείο σε αρχείο .doc στον επιβλέποντα Καθ. Θ. Μαυρομούστακο στο ηλεκτρονικό ταχυδρομείο tmavrom@chem.uoa.gr

**ABALONE**

1. **Να γράψετε την ενέργεια που υπολογίσατε μετά την εφαρμογή ελαχιστοποίησης μηδενικού βαθμού του βουτυλοβενζολίου.**

Απάντηση:…………………………………………………………………………………………………

1. **Να υπολογίσετε την ενέργεια ελαχιστοποίησης του βουτυλοβενζολίου μετά από εφαρμογή**

(α) PR (500 σαρώσεις)

(β) SD (500 σαρώσεις)

(γ) CD (500 σαρώσεις)

 Να εφαρμόσετε 500 σαρώσεις και στους υπόλοιπους αλγορίθμους και να γράψετε την τελική ενέργεια ελαχιστοποίησης.

Απάντηση:…………………………………………………………………………………………………

……………………………………………………………………………………………………………….

……………………………………………………………………………………………………………….

……………………………………………………………………………………………………………….

……………………………………………………………………………………………………………….

……………………………………………………………………………………………………………….

……………………………………………………………………………………………………………….

……………………………………………………………………………………………………………….

……………………………………………………………………………………………………………….

……………………………………………………………………………………………………………….

……………………………………………………………………………………………………………….

……………………………………………………………………………………………………………….

……………………………………………………………………………………………………………….

……………………………………………………………………………………………………………….

……………………………………………………………………………………………………………….

……………………………………………………………………………………………………………….

……………………………………………………………………………………………………………….

……………………………………………………………………………………………………………….

……………………………………………………………………………………………………………….

……………………………………………………………………………………………………………….

**CHIMERA**

**Να μετρήσετε και να καταγράψετε τέσσερις (α) C-H αποστάσεις (β) γωνίες και (γ) δίεδρες γωνίες στο μόριο του διπεπτιδίου Ala-ALa.**

**C-H αποστάσεις**

1.

2.

3.

4.

Γωνίες

1.

2.

3.

4.

**Δίεδρες γωνίες**

1.

2.

3.

4.

**PyRX**

**Να αποθηκεύσετε το αρχείο με την ευνοϊκότερη διαμόρφωση πρόσδεσης της λοσαρτάνης από κάθε υποδοχέα που επιλέξατε και να καταγράψετε την ενέργεια πρόσδεσης.**

**ΑΠΟΘΗΚΕΥΜΕΝΗ ΕΙΚΟΝΑ (υποδοχέας CXCR4)**

Ενέργεια πρόσδεσης

**ΑΠΟΘΗΚΕΥΜΕΝΗ ΕΙΚΟΝΑ (υποδοχέας ροδοψίνης)**

Ενέργεια πρόσδεσης

**Να συγκρίνετε τις ενέργειες πρόσδεσης στους δύο υποδοχείς και να εξηγήσετε τη διαφορά στην ενέργεια τους.**